



## **Hvad der var brandvarmt indenfor analytisk kemi denne sommer**

### **Rejsebeskrivelser fra fire internationale analytisk kemi-konferencer**

Nielsen, Nikoline Juul; Jäpelt, Kristina Bak; Skov, Søren Furbo; Trier, Xenia; Græsbøll, Rune; Kristiansen, Mie Berg ; Christensen, Jan H.

*Published in:*  
Dansk Kemi

*Publication date:*  
2013

*Citation for published version (APA):*

Nielsen, N. J., Jäpelt, K. B., Skov, S. F., Trier, X., Græsbøll, R., Kristiansen, M. B., & Christensen, J. H. (2013). Hvad der var brandvarmt indenfor analytisk kemi denne sommer: Rejsebeskrivelser fra fire internationale analytisk kemi-konferencer. *Dansk Kemi*, 94(11), 10-13.



# dansk kemi

Nummer 11 - November 2013 / 94. årgang

Fremtidens  
EU-patent

Biokatalysatorens  
vej til industrien

Naturstoffer og diabetes

**SEND LÆGEHJÆLP NU – STØT MED 150 KR.**

Ring nu på 90 540 840

SMS "MEDICIN" til 1414

Støt online på [msf.dk](http://msf.dk)

Ved at støtte via sms eller telefon accepterer du, at Læger uden Grænser kontakter dig igen. Det koster 150 kr.  
+ almindelig sms-takst. Udbydes af Læger uden Grænser, Dronningensgade 68, 3. 1420 København K, tlf. 39775600.





# Hvad der var brandvarmt indenfor analytisk kemi denne sommer

- Rejsebeskrivelser fra fire internationale analytisk kemi-konferencer.



Figur 1. Analytisk Kemi Gruppen på det Naturvidenskabelige Fakultet ved Københavns Universitet. Billedet er fra foråret 2013. Gruppen hører til på Institut for Plante- og Miljøvidenskab i Sektion for Mjlk kemi og Fysik.

Af Nikoline J. Nielsen<sup>1</sup>\*, Kristina B. Jäpelt<sup>1</sup>, Søren F. Skov<sup>1</sup>, Xenia Trier<sup>2</sup>, Rune Græsbøll<sup>1</sup>, Mie Berg Kristiansen<sup>1</sup> og Jan H. Christensen<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Analytisk Kemi Gruppen, Sektion for Mjlk kemi og Fysik, Institut for Plante- og Miljøvidenskab, Det Naturvidenskabelige Fakultet, KU. <sup>2</sup>Fødevarer instituttet, DTU

Denne sommer bød på flere uimodståelige europæiske analytisk kemi-konferencer. Vi har været så heldige at kunne deltage med en række dygtige studerende.

Som begrænsning må vi nok fremhæve, at vores samlede præferencer dækker væske- og gaskromatografi herunder også multi-dimensional separation, massespektrometri, kemisk fingerprinting anvendt til oliekarakterisering og metabolit-

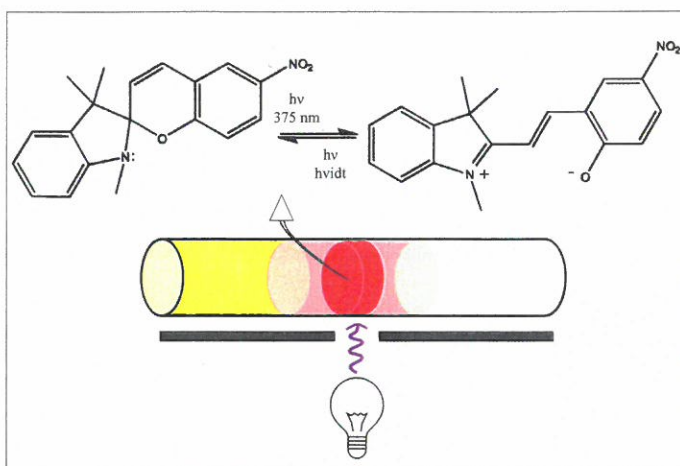
analyse, processering af analytisk kemiske data eller anvendt kemometri samt analyse af miljø- og fødevarer kontaminanter.

Denne artikel bringer højdepunkter og mere generelle indtryk fra fire konferencer: 39<sup>th</sup> International Symposium on High-Performance-Liquid-Phase-Separations and Related Techniques (forkortet HPLC 2013) i Amsterdam, juni; 9<sup>th</sup> Annual Conference of the Metabolomics Society (forkortet Metabolomics 2013) i Glasgow, juli; 17<sup>th</sup> European Conference on Analytical Chemistry (forkortet Euroanalysis 2013) i Warszawa, august og 3<sup>rd</sup> European GCxGC symposium (forkortet GCxGC 2013) i Nice, september. Alle konferencer var rejsen værd, men vores varmeste anbefalinger går til HPLC- og Metabolomics-konferencerne.

## HPLC 2013 i Amsterdam ved Xenia, Rune, Mie, Jan og Nikoline

Dette var sommerens (faglige) højdepunkt! Vi kickstartede konferencen med Dwight Stolls minikursus i LCxLC, hvor vi fik leveret et solidt og veldisponeret overblik fra en fabelagtig underviser. Konferencen er enorm med 1400 deltagere og mere end 1000 videnskabelige plakater. Den kører over fire dage med fire parallelle sessioner hvoraf det ene spor udelukkende kører "tutorials" – dvs. forelæsninger indenfor specifikke emner, f.eks. todimensional væskrokromatografi eller enantiomerisk separation. Altså et fantastisk sted at tage selv relativt unge studerende med til. Konferencen er godt besøgt af de største kanoner indenfor separationsvidenskab og relaterede felter, f.eks. massespektrometri. Stemningen er favnende, og der er meget at lære.

Overordnet hæfter vi os ved, at todimensional væskrokromatografi er eksploderet som felt siden HPLC 2011 i Budapest. Værd at bemærke er også renæssancen af superkritisk væskrokromatografi (SFC), hovedsageligt igangsat af nyt kommercielt udbud instrumentel. Mange af de problemer, der har stemplet teknikken som lidet reproducerbar, er i hvert fald delvist løst. F.eks. kan tryk og flow kontrolleres bedre, ligesom den organiske modifier kan tilsættes mere præcist. På trods af at SFC-analyser oftest køres uden at nå op i det superkritiske område, er der mange som øjner nye applikationsmuligheder.



Figur 2. En del af den monolitiske kolonne indeholder en molekylær omskifter ("switch", i rød). Omskifteren veksler fra sin neutrale til sin zwitter-ioniske form, når den belyses med 375 nm UV-lys, og bliver således retentiv i en ion-bytnings kontekst (i lys rød). Når ombytteren belyses med hvidt lys vender den tilbage til sin neutrale form, og bliver non-retentiv i en ion-bytnings kontekst. Kapaciteten af den molekylære ombytter undersøges for på sigt at kunne opnå tænd/sluk foto-induceret retention. Figuren har vi fået fra Henrik Corneliusen van der Ven.



Af enkeltstående præsentationer skal nævnes: Ulrich Tallarek, som dokumenterer, at vandlaget umiddelbart op til en silica stationær fase er "ice-like", dvs. stort set ikke mobilt [1]; Ron Peters der gav et virkeligt godt overblik over, hvilke reelle "peak-kapaciteter" vi kan opnå med koblede LC-MS-systemer, når både bidrag fra LC- og MS-systemer tages i betragtning (ikke publiceret); Sebastian Eeltink med sit bidrag til udviklingen af tredimensionel spatiel separation; den todimensionelle separation er implementeret på en chip og opnås ved at kombinere en lillebitte monolith med isoelektrisk fokusering (ikke publiceret); unge Henrik Corneliussen van der Ven fra Peter Schoenmakers gruppe der kan styre en spiro/spirane stationær faser selektivitet (her polaritet) ved brug af lys/mørke, på sigt måske med anvendelse indenfor refokusering i LCxLC (ikke publiceret, men Henrik har lavet figur 2); og sidst Jelle de Vos, Gert Desmet og igen Sebastiaan Eeltink der eksemplificerer, hvordan vi kan minimere top-bredder ved kun at detektere i kolonne-centrum, hvor flowprofilen er mere homogen (ikke publiceret). Vi kunne blive ved...

Konferencen afholdes lige år i Nordamerika og ulige år i Europa. I krogene lyder det, at den europæiske konference ligger i top; næste gang skal vi til HPLC 2015 i Geneve, Schweiz.

### Metabolomics 2013 i Glasgow ved Kristina

På trods af at HPLC 2013 lige er blevet udnævnt til sommerens højdepunkt, så mener jeg dog, at Metabolomics 2013 er en hård konkurrent. Konferencens fokus var langt mere på applikation end grundforskning, hvilket på ingen måde gjorde den mindre spændende. Det analytiske niveau var højt og interessante

problematikker blev diskuteret af foredragsholderne med god deltagelse fra publikum.

Allerede den første dag af konferencen var det tydeligt, at de høje forventninger til de næste fire dage ville blive indfriet. Dagen bød på en række spændende workshops. Specielt workshoppen *The Role & Development of Separation Techniques in Metabolomics* med foredrag af Dave Watson, Oliver Fiehn og Tomoyoshi Soga fik fat i publikums opmærksomhed. De efterfølgende dage forløb med parallelle sessioner omhandlende temaer helt fra modelorganismer og kræftforskning til miljøundersøgelse og plantefysiologi – alle foredrag med metabolomics som omdrejningspunkt. Der er ingen tvivl om, at metabolomics er kommet for at blive. Det var dog tydeligt, at kvalitetssikringen af data forbliver en stor udfordring indenfor området. Derfor var det spændende at se den kritiske præsentation af Jean-Charles Martin "Kan vi stole på untargeted metabolomics?" med resultaterne fra en stor Metabo-Rings undersøgelse. På trods af stor variation i de benyttede analytiske platforme var der overvejende stor overensstemmelse i den spektrale information og konklusionerne opnået på tværs af metabolomics laboratorier. Et eksempel på arbejdsgangen i en "untargeted metabolomics"-tilgang er givet i figur 3, side 12.

Metabolomics 2013 skulle man ikke tage til for at få en gastronomisk oplevelse for efter fire dage med tørre trekantssandwichs, butter cookies og bitter te, glædede man sig til at komme retur til Danmark. Men konferencen er dog på alle måder tiden værd, hvis man ser det fra et fagligt synspunkt. Jeg deltager igen i Japan 2014, og håber her, at maden er lidt mere spændende, men workshops og foredragene lige så fængende som i 2013. ►

### Flere og flere vælger

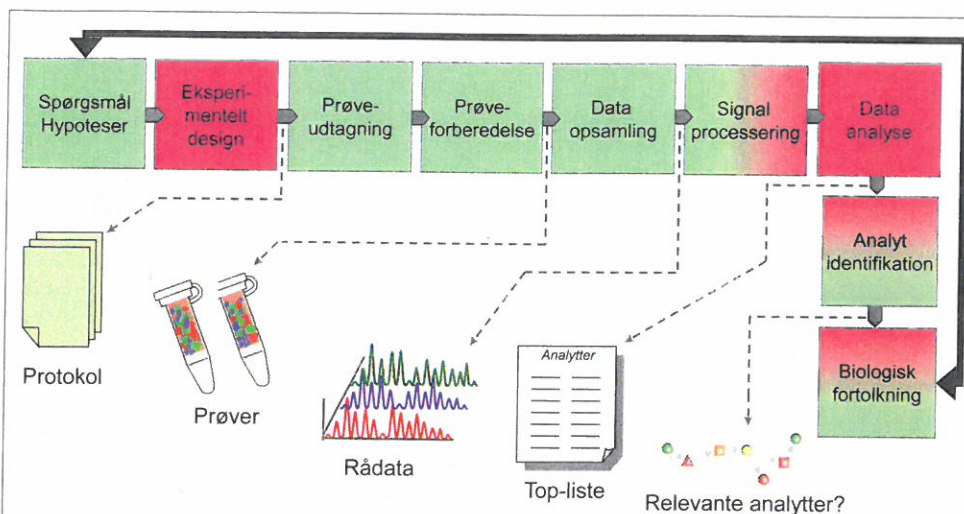
## Gasdetektering som en service

# Gas Detect



GasDetect · gas.dk · Tlf. 42425070 · info@gas.dk





Figur 3. En kæde af delopgaver som udgør et "untargeted metabolomics"-eksperiment viser tydeligt, at dette er et multidisciplinært område. Konklusionerne, der kan drages i enden, er meget afhængige af, hvorledes de enkelte trin i kæden er tilrettelagt og udført. Ordsproget "garbage in, garbage out" er ret brugt, når vigtigheden af hvert enkelt trin i kæden og deres indbyrdes sammenhæng skal understreges. Farvekoden indikerer, hvornår vi bevæger os indenfor mere traditionel analytisk kemi (grøn), og hvornår vi er i et mere matematisk og statistisk univers (pink).

## Euroanalysis 2013 i Warszawa ved Nikoline

Denne konference går for at lægge mere vægt på det akademiske end det anvendte. Det første indtryk er, at her er en god repræsentation fra Østeuropa og mindre god repræsentation af applikationer på tungt og dyrt instrumentel. Ingen af de store instrumentfirmaer var repræsenteret. Men det behøver jo ikke at være noget dårligt. Især så jeg frem til indlæg fra Barceló- og Mondello-grupperne: Barceló har sat et imponerende fodaftryk på miljøanalyser, og snakkede om metodeudvikling ift. monitorering af nanostrukturer i miljøet, eksemplificeret ved fullerener, og der trækkes paralleller til traditionel kolloid-kemi [2]; fra Mondello-gruppen kom Paula Donato med en forelæsningsagtig introduktion til todimensionel LC – egentlig mere genkendeligt end spændende. De tre mest interessante etablerede forskere var: Douglas Ruthledge som promoverede en Matlab-pakke (ComDim), der på elegant vis fusionerer og vægter data fra flere forskellige analytiske platforme, f.eks. NMR og MS inden multivariat analyse [3]; Christian Rolando der fortalte om todimensionel FT-ICR MS, hvor man på en enkelt kørsel kan få fulde precursor ion spektra i én dimension med quadrupol-lignende resolution, og fulde produkt ion spektra i den anden dimension med FT-ICR-lignende resolution ved at styre eksitations og kodningspulsers fase og timing [4]; Rudolf Krska med et omfangsrigt, dybdegående, underholdende indlæg om målrettet og bredere LC-MS-analyse af svampetoksiner [5]. Bl.a. havde en Ph.D.-studerende doseret sig selv med deoxynivalenol (DON)-kontamineret fødevarer svarende til 2,3 gange tolerabelt dagligt indtag, for efterfølgende at måle ekskretion af DON fordelt på 9 metabolitter, heraf også nye [6]. Det bedste unge indslag kom fra Julia Kuligowski, der gennemgik et fornuftigt fingerprinting-studie, hvor en lovende biomarkør for iltmangel-induceret hjerneskade (hypoxia) hos nyfødte blev identificeret, i første omgang i øjets nethinde hos minigrise fordi dette organ er meget iltfølsomt [7]. Julia specificerer, at vi selvfølgelig ikke kan fjerne øjne hos nyfødte for at påvise hypoxia, men at hun håber at kunne detektere biomarkøren i urin.

Konferencen har, som den eneste mig bekendt, en session om undervisning, hvilket gør den ret interessant for universitetsansatte. Desværre kom jeg til at prioritere en stærk kemometri-

session på samme tid, så undervisnings-sessionens indhold er svært at evaluere.

## GCxGC 2013 i Nice ved Søren

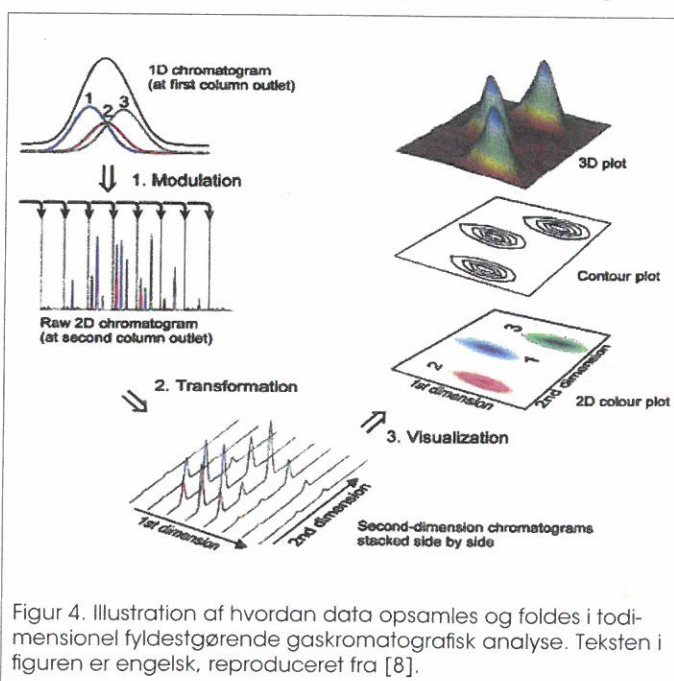
GCxGC-analyse er karakteriseret ved at udløbet af første dimensions-kolonne fraktioneres i portioner af sekunders varighed. Fraktionerne fokuseres vha. f.eks. kryo-køling og sættes på en anden dimensions-kolonne, hvor der køres gentagne ultrahurtige separationer. På den måde kan komponenter, der overlapper efter første separation, adskilles i anden dimension. Konceptet er illustreret i figur 4.

Det mest karakteristiske ved symposiet var næsten hvilke emner, der ikke var fokus på. For 5 år siden blev GCxGC oftest opfattet som en analysemetode til petroleum og måske lidt til miljøanalyser, men på dette års symposium optrådte petroleum slet ikke som et selvstændigt emne.

I stedet var næsten halvdelen af symposiet helliget aroma og mad. Derudover var der nogle foredrag om miljørelaterede emner, herunder petroleum og kultjære, og en lille smule om både metabolomics og apparatteknik.

Under overskrifterne aroma og mad fortalte Henryk Jelén om, hvordan GCxGC-MS hjælper til analyse af whisky ved at reducere mængden af overlappende toppe ift. GC-MS, mens Stefan Bieri fortalte om chiral GCxGCs anvendelighed i forsøget på at kende forskel på kunstige og naturlige aromaer. Dr. Laurent Le Thuaut fortalte om undersøgelser af kæledyrs præferencer inden for dyremad.

Under apparatteknik præsenteredes det, der formentlig bliver LECO's næste apparat: En GCxGC koblet til et højtopløseligt massespektrometer. Med den teknik vil man ikke blot få et klassisk massespektrum af de stoffer, der eluerer, men også den



Figur 4. Illustration af hvordan data opsamles og foldes i todimensionel fyldestgørende gaskromatografisk analyse. Teksten i figuren er engelsk, reproduceret fra [8].



eksakte masse, som giver mulighed for at bestemme molekylformlen, og for at adskille stoffer med samme nominelle masse men forskellig sumformel. Selvom det kan være svært at forestille sig nødvendigheden af flere datapunkter end det GCxGC-MS allerede kan præstere, så viser historien, at bedre adskillelse altid medfører uventede fordele i analysen. Større selektivitet i masse-retningen kombineret med GCxGC bliver nok ingen undtagelse.

### Afsluttende bemærkninger

Det har været en god sæson for analytisk kemi: bredden i konference-udbuddet og deltagerkaren har gjort det muligt at holde sig nogenlunde internationalt orienteret, også selvom vi bliver nødt til at prioritere tid og økonomi ganske skarpt. Og konferencer er en sjov måde at lære nyt på! Bachelor-studerende Mie udtalte f.eks. efter første dag på HPLC 2013: "Det er jo ligesom Roskilde Festival, bare for forskere". Specielt var vi imponerede over det fire-dages spor på HPLC 2013, der udelukkende bestod af forelæsninger. Det var et fantastisk tilbud til studerende med hang til analytisk kemi. Metabolomics-konferencerne bliver også interessante at følge, der er virkelig mange udfordringer at tage op indenfor dette relativt nye felt.

Ses vi til analytisk kemi-konferencer i fremtiden? Det tror vi nok vi gør!

Vi takker Chr. Hansen for rejsehjemmel til ph.d.-studerende Kristina, Dansk Selskab for Analytisk Kemi for rejsehjemmel ifm. international repræsentation ved DAC - EuCheMS årsmøde og Euroanalysis-konferencen for Nikoline, og LECO Corporation for rejsehjemmel til postdoc Søren.

E-mail

Nikoline J. Nielsen: njn@life.ku.dk

### Referencer

1. Melnikov, S.M.; Höltzel, A.; Seidel-Morgenstern, A.; Tallarek, U. (2013). Adsorption of water-acetonitrile mixtures to model silica surfaces. *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 117, s. 6620-6631.
2. Ed: Barceló, D.; Farré, M.; Bennett, J.; Hanson, M. (2013). Speciel virtuel udgave af *Science of the Total Environment*: Nanomaterials in the environment.
3. Qannari, E.; Wakeling, P.; Courcoux, P.; MacFie, H.J.H. (2000). Defining the underlying sensory dimensions. *Food Quality and Preferences*, vol 11, s. 151-154.
4. van Agthoven, M.A.; Delsuc, M.-A.; Bodenhausen, G.; Rolando, C. (2013). Towards analytically useful two-dimensional Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, vol. 405, s. 51-61.
5. Ed: Schuhmacher, R.; Krska, R.; Weckwerth, W.; Goodacre, R. (2013): Special udgave af *Analytical and Bioanalytical Chemistry*: Metabolomics and metabolite profiling, vol. 405(15), s. 5003-5169.
6. Warth, B.; Sulyok, M.; Berthiller, F.; Schuhmacher, R.; Krska, R. (2013). New insight into the human metabolism of the Fusarium mycotoxins deoxynivalenol and zearalenone. *Toxicology Letters*, vol. 220, s. 88-94.
7. Solberg, R.; Escobar, J.; Arduini, A.; Torres-Cuevas, I.; Lahoz, A.; Sastre, J.; Saugstad, O.D.; Vento, M.; Kuligowski, J.; Quintás, G. (2013). Metabolic analysis of the effect of postnatal hypoxia on the retina in a newly born piglet model. *PLOS ONE*, vol. 8(6).
8. Adahchour, M.; Beens, J.; Vreuls, R.J.J.; Brinkman, U.A.T. (2006): Recent developments in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GCxGC): I. Introduction and instrumental set-up. *Trends in Analytical Chemistry*, vol. 25(5), s. 438-454.

## Vikar- og rekrutteringsbureau for Laboratoriebranchen

LabVikar ApS er Danmarks suverænt laboratoriespecifikke vikar- og rekrutteringsbureau. Her finder man over 20 faggrupper spækket med velkvalificerede kandidater indenfor alt hvad der "lugter lidt" af Laboratorie og hvide kitler som f.eks.:

- Laboranter
- Cand. Scienter
- Procesteknologer
- Levnedsmiddelingenører
- Laboratoriemedhjælpere
- Miljøteknikere
- Laboratoriesalgskonsulenter
- Mejerister
- Mejeriingeniører
- Klinikassistenter
- Laboratorieteknikere
- Laboratorietandteknikere

**Vi tilbyder kandidater til både vikariater og til fastansættelse**  
**Vi afdækker arbejdsområder både i og udenfor laboratorierne**  
**Vi er landsdækkende - og breder os også lidt til udlandet**



LabVikar ApS har hovedsæde i Odense, hvor "kommandocentralen" er beliggende. På LabVikars 7 års fødselsdag den 1. juni 2013, flyttede kontoret til nye større lokaler.

Kontakt **Direktør Rikke Merton** på

**50 70 19 72**

- eller send en mail til:  
kunde@labvikar.dk

**NY ADRESSE:**  
Buchwaldsgade 50  
kontor 1,  
5000 Odense C.

**LabVikar** APS

**www.labvikar.dk**